



рис.2 Кривая релаксации фототока измеренная на экспериментальной структуре после отключения источника освещения.

В докладе приводятся результаты экспериментальных измерений, а также интерпретация полученных результатов.

Список публикаций:

- [1] Р.М. Гадиев, А. Н. Лачинов, В. М. Корнилов, Р.Б. Салихов, Р.Г. Рахмеев, А.Р. Юсупов. Письма в ЖЭТФ 90, 821 (2009).
- [2] В.А. Антипин, А.Н. Лачинов, Д.А. Мамыкин, А.А. Ковалёв, С.С. Остахов, В.В. Шапошникова, С.Н. Салазкин, В.П. Казаков, Химия высоких энергий. 44, 4, 345 (2010)
- [3] H.-W. Zanz, K.-H.Yen *Electrochemical and Solid-State Letters*. 11,8, 222 (2008).

Первопринципное исследование структуры кристаллогидратов

Бызова Елена Сергеевна

Кемеровский государственный университет

Журавлев Юрий Николаевич, д.ф.-м.н.

L6930@mail.ru

Кристаллогидраты считаются довольно распространенными веществами в нашей жизни. Их применение обширно: протравливание семян, крашение древесины, в качестве вяжущего и антисептического средства, дезинфекция, производство антиперспирантов и прочее. Изучение этого класса соединений началось еще в XIX веке, сейчас же ученые серьезно продвинулись вперед. Это касается как поиска новых способов их применения, так и методов борьбы с вредным гидратообразованием, мешающим процессам на производстве [1-3]. Разумеется, существует два подхода к проведению исследований: теоретические расчеты и эксперименты. Методы компьютерного моделирования привлекают тем, что дают возможность прогнозировать свойства ранее неизвестных структур или же недостаточно изученных, причем точность сопоставима с экспериментальными результатами.

Таким образом, в данной работе был проведен первопринципный расчет структуры моногидрокарбоната ($\text{CaCO}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$). Не смотря на то, что этот объект в настоящее время вполне неплохо изучен, для нашей цели он подходит отлично: для будущих расчетов различных кристаллогидратов необходимо отладить методику вычислений. Исследование проводилось при помощи нового (относительно прошлой версии, в которой мы работали ранее [5]) программного пакета CRYSTAL17 [6]. В нем метод Хартри-Фока совместно с теорией функционала плотности DFT позволяет выполнять квантовохимические вычисления с хорошей точностью.

Для выбора оптимальной методики расчета параметров кристаллогидратов было решено провести ряд вычислений подобно тому, как ранее было сделано при исследовании льда [7]. Среди функционалов были взяты pbe, pbe-d3, b3lyp, b3lyp-d3. Суффикс d3 является новым для программы CRYSTAL17, он позволяет учесть дисперсионное взаимодействие. В качестве базиса были использованы встроенные в программу минимальные базисы Попла STO-3G, STO-6G, а также совокупность Ca_86-511d3G_catti_1991, C_6-31d1G_gatti_1994, O_6-31d1_gatti_1994 и H_3-1p1G_gatti_1994 (в таблице обозначена ***) из специальной библиотеки, разработанной для подобных расчетов [8]. Результаты представлены в таблице:

Функционал	Базис	a, Å	c, Å	V, Å	Погрешность, %
b3lyp	***	10,5519	7,5471	727,729	0,37
	STO-3G	10,2588	7,3939	673,900	9,08
b3lyp-d3	***	10,3661	7,4097	689,538	6,46
	STO-3G	10,1323	7,3097	649,902	13,44
	STO-6G	10,1079	7,3060	646,449	14,08
pbe	***	10,5217	7,5299	721,929	1,22
	STO-3G	10,3291	7,4445	687,845	6,67
pbe-d3	***	10,5367	7,4227	698,776	4,83
	STO-3G	10,2548	7,3943	673,422	9,16

Погрешность рассчитывалась как среднеквадратичное отклонение по параметрам кристаллической решетки и объему элементарной ячейки [4]: $a = 10,5547 \text{ Å}$, $c = 7,5644 \text{ Å}$, $V = 729,788 \text{ Å}^3$. При использовании базиса STO-6G расчеты приводят к ошибке из-за малых расстояний между соседними атомами, поэтому в таблице приведен только один получившийся расчет с этим базисом. Очевидно, пара b3lyp-d3 и STO-6G дает наибольшую погрешность по сравнению с экспериментом. Наиболее удачными оказались b3lyp и ***, а также pbe и ***. Первый метод мы будем использовать для расчета структур кристаллогидратов, как более точный. Второй же подойдет для изучения механических, тепловых и электронных свойств, т.к. оптимален и по точности, и по скорости расчетов.

Таким образом, в результате перебора разных сочетаний функционалов и базисных наборов определены два оптимальных метода вычислений для кристаллогидратов в рамках программного пакета CRYSTAL17. Погрешность по сравнению с экспериментом составила всего 0,37 % для функционала b3lyp и 1,22 % для функционала pbe, базисный набор в обоих случаях был взят из библиотеки базисов для каждого химического элемента: Ca_86-511d3G_catti_1991, C_6-31d1G_gatti_1994, O_6-31d1_gatti_1994 и H_3-1p1G_gatti_1994. Следующим шагом будет проведение квантовомеханического исследования структуры и различных физических свойств перспективных кристаллогидратов.

Список публикаций:

- [1] Глинка Н.Л. *Общая химия: учебное пособие для вузов* // М.: Интеграл-Пресс. 2003. 728с.
- [2] Глебова Л.В., Медникова О.Л. *Методы борьбы с гидратообразованием* // Геология, география и глобальная энергетика. 2014. №3(54). С.71-73.
- [3] Вершинин С.Н. *Кристаллогидраты неорганических солей как охлаждающие элементы дыхательной смеси в шахтовых самоспасателях* // Энергетическая безопасность Новые подходы к развитию угольной промышленности. 2012. С.60-62.
- [4] Swainson I.P. *The structure of monohydrocalcite and the phase composition of the beachrock deposits of Lake Butler and Lake Fellmongery, South Australia* / I.P. Swainson // American Mineralogist. 2008. V.93. P. 1014 – 1018
- [5] Бызова Е.С. Молекула H₂O с точки зрения симметрии/ Е.С. Бызова, Ю.Н. Журавлев // ВХКСФ-25, материалы конференции. 2019. С.48-49.
- [6] Dovesi R. *CRYSTAL17 User's Manual* / R. Dovesi, V.R. Saunders, C. Roetti // Torino: University of Torino. 2017.
- [7] Шайкомалова Е.С. Структура и свойства фазовых состояний льда/ Е.С. Шайкомалова (Бызова), Ю.Н. Журавлев// Журнал структурной химии. 2019. Т.60, №1. С.64-70.
- [8] CRYSTAL – Basis Sets Library [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.crystal.unito.it/basis-sets.php>. (Дата обращения: 22.12.2019).

Оптические свойства прозрачной керамики MgAl₂O₄ облученной ионами меди

Ваганов Александр Шамилевич¹

Киряков Арсений Николаевич¹, Шапова Юлия Владимировна^{1,2} Гольева Е.В.³

¹Уральский федеральный университет

²Институт геологии и геохимии УрО РАН

³Санкт-Петербургский государственный университет

Зацепин Анатолий Федорович¹, к.т.н.

Alexander1705q@icloud.com

Керамики алюмо-магниевого шпинели (АМШ) являются перспективным оптическим материалом, для устройств оптоэлектроники и фотоники [1]. Высокая химическая, механическая, а также радиационная стойкость позволяет проводить ионную имплантацию таких керамик повышенными дозами. В результате ионной имплантации в матрице шпинели формируются как собственные дефекты анионной и катионных подрешеток, так и примесные дефекты, связанные с типом имплантируемых ионов. При этом происходит модификация керамики новыми оптически-активными центрами. Цель данной работы заключается в исследовании оптических свойств керамики АМШ до и после ионной имплантации Cu²⁺.